



TITLE:

Dense Kondo系について(V. 理論, 価数揺動状態の総合的研究, 科研費研究会報告)

AUTHOR(S):

山田, 耕作

---

CITATION:

山田, 耕作. Dense Kondo系について(V. 理論, 価数揺動状態の総合的研究, 科研費研究会報告). 物性研究 1984, 42(6): 36-39

ISSUE DATE:

1984-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/91429>

RIGHT:

## Dense Kondo 系 について

京大基研 山田耕作

主に Ce 系と Yb 系の金属・合金・化合物で観測される Dense Kondo 的振舞の起源について考える。結論からいえば Dense Kondo 系は文字通り「Kondo 効果が高密度で実現している系」であって、高密度なり、周期系であることによる特徴はあるものの基本的には Kondo 効果で理解できるということである。ただし、これまでこのように考えるとしても、磁性イオン間の相互作用に打ち勝って、Kondo 効果が現われる理由がはっきりしなかった。その理由について報告する。<sup>1)</sup>

1] 異なる格子点にある局在スピン間の相互作用 (RKKY) は局在スピン  $S$  の大きさの 2 乗に比例すると考えられる。Ce や Yb では夫々  $f$  電子,  $f$  正孔が 1 個で  $S = \frac{1}{2}$  であり, Gd ( $S = 7/2$ ) の約 2% にまで相互作用が小さくなると考えられる。

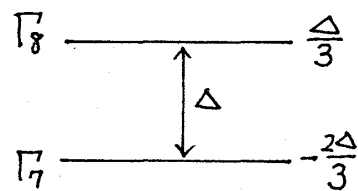
2]  $f$  電子と伝導電子の間の交換相互作用は,  $s$  間の RKKY 相互作用にも Kondo 温度  $T_K$  にも共に効く parameter である。従って, Kondo 温度  $T_K$  が相対的に高くなるためには, 何か特別の事情があると考えられる。

10 年前, Okada-Yosida は<sup>2)</sup>  $d$ -shell 内に局在電子をもつ系の Kondo 効果を議論した。その中で,  $d$ -shell 内に 1 個の局在電子がある場合には,  $d$  軌道の縮退のため, 基底状態の結合エネルギーが  $\bar{E} = -D_0 \exp[N/(2l+1)PT_0]$  となることを示した。ここで  $D_0$  は伝導帯の中,  $J < 0$  である ( $l=2$ )。一方,  $Mn$  に相当して, Hund's coupling が強く, それによって軌道角運動量が消滅して  $L=0$  となった系では, 逆に  $\bar{E} = -D_0 \exp[N(2l+1)/PT_0]$  ときわめて小さくなることを示した。このような違いは, 局在電子 (正孔) が 1 個の場合, 縮退した軌道の  $2l+1$  個の channel を通じて, bound state が強く結合できるためである。

以上の議論は, 軌道・スピン相互作用の大きい  $f$  電子系でも同様で, 電子又は正孔が 1 個の場合, Coqblin-Schrieffer の Hamiltonian を仮定して,  $\bar{E} = -D_0 \exp[N/PT_0(2j+1)]$  となる。ここで Ce では  $j = 5/2$ , Yb では  $j = 7/2$  である。従ってこのように  $f$ -shell に縮退があれば, 高い  $T_K$ , 大きな結合エネルギーが期待される。ところが現実には結晶場分裂が数 10 ~ 数 100 K の大きさで存在し, これは  $T_K$  より大きく基底状態の縮退度は小さくなると考えられる。従って上述のような縮退の効果で  $T_K$  を高くすることは期待できないように見える。しかし, 結晶場の果たす役割は微妙であり, 詳しく検討する必要がある。その点を明らかにするのが本稿の主な目的である。

例として Ce ( $j = 5/2$ ) が Cubic な結晶場で doublet  $\Gamma_7$  と quartet  $\Gamma_8$  に分裂した場合を考える。図 1 に  $\Gamma_7$  が基底状態の場合が示してあるが  $\Gamma_8$  が下の時は splitting  $\Delta$  が

負と考ればよい。伝導帯の中(D)を小さくし、その効果を Coupling Constant  $\tilde{J}$  にくく込むという Anderson の scaling の方法に従うと次の方程式を得る。



(図 1)

$$\frac{d\tilde{J}}{dD} = \frac{4}{D+\Delta} \tilde{J}^2 + \frac{2}{D} \tilde{J}^2 \quad \dots (1)$$

ここで、右辺の係数 4 と 2 は結晶場分裂した levels の縮重度を反映している。又、 $\frac{1}{D}$  項の分母に  $\Delta$  が入るのは局在電子が中間状態として  $\Gamma_8$  ( $\Delta > 0$ ) に入ったためである。Scale するもとの Hamiltonian は  $M, M'$  を  $j=5/2$  の結晶場分裂した固有状態として

$$H_{ex} = -\frac{J_0}{2N} \sum_{\substack{k, k' \\ M, M'}} C_{kM}^+ C_{k'M'}^+ a_{M'}^+ a_M \quad \dots (2)$$

のように与えられるものを考えている。<sup>3)</sup> この方程式を初期条件  $D=D_0$ ,  $\tilde{J}=\frac{J_0 \rho}{2N}$  のもとで解くと

$$\tilde{J} = \frac{J_0 \rho}{2N} \left[ 1 + \frac{2J_0 \rho}{N} \log \frac{D_0}{D+\Delta} + \frac{J_0 \rho}{N} \log \frac{D_0}{D} \right]^{-1} \quad (3)$$

となる。この(3)式は

$$D \gg \Delta \text{ では } \tilde{J} = \frac{J_0 \rho}{2N} \left[ 1 + \frac{3J_0 \rho}{N} \log \frac{D_0}{D} \right]^{-1} \quad (4)$$

$$D \ll \Delta \text{ では } \tilde{J} = \frac{J_0 \rho}{2N} \left[ 1 + \frac{2J_0 \rho}{N} \log \frac{D_0}{\Delta} + \frac{J_0 \rho}{N} \log \frac{D_0}{D} \right]^{-1} \quad (5)$$

と近似できる。今、 $T_K < \Delta$  とすると  $T_K$  は(5)式で  $\tilde{J}=\infty$  を与える  $D$  として定まる。

$$T_K = D_0 e^{\frac{N}{J_0 \rho} \left( 1 + \frac{2J_0 \rho}{N} \log \frac{D_0}{\Delta} \right)} = \left( \frac{D_0}{\Delta} \right)^2 D_0 e^{\frac{N}{J_0 \rho}} \quad (6)$$

ここで得られた  $T_K$  には、 $\Delta \rightarrow \infty$  として上の  $\Gamma_8$  の level を無視した場合に比べて  $(D_0/\Delta)^2$  倍にする factor がかかっている。

同様に quartet  $\Gamma_8$  が基底状態の場合は (Case 2)

$$T_K = \sqrt{\frac{D_0}{\Delta}} D_0 e^{\frac{N}{2J_0 \rho}} \quad \text{となる。}$$

以上の結果を用いて  $T_K$  及び  $\tilde{J}_0 = J_0 \rho / N$  の数値を例示したのが表である。

また、これまで scaling law に基いて議論してきたが、Yosida 理論に基いて基底状態の結合エネルギーを議論することも可能で、すでに小川-吉森によってなされている。<sup>3)</sup> その理論を用いて cubic field の下で  $\Gamma_7$  が下 (Case 1) の場合の essential binding energy ( $T_K$  に対応する) と  $\Gamma_7$  states の weight (卓線) を  $\Delta$  の関数として表わし

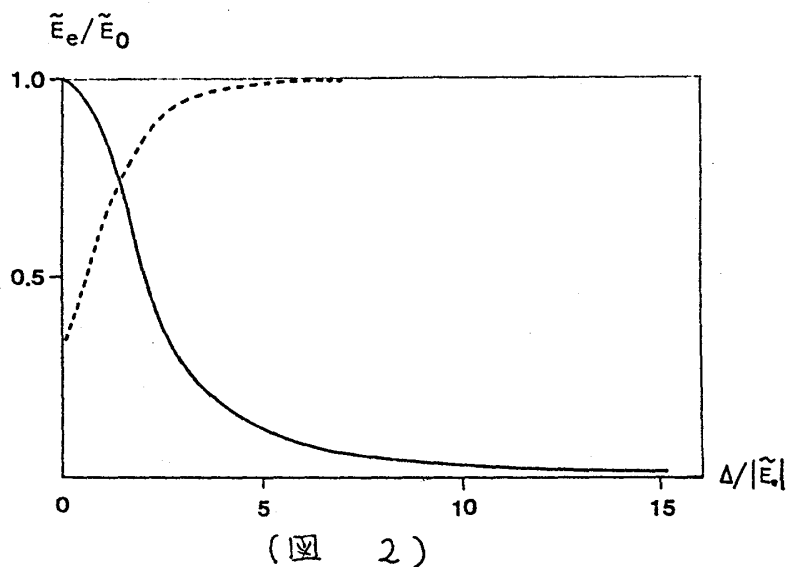
たのが図2である。△と $\tilde{E}_e$ 共に△=0の時の結合エネルギー $\tilde{E}_0$ をunitにしてある。 $\Delta/|\tilde{E}_e| = 10$ の場合、 $T_K$ を6%取り込むことによって基底状態の結合エネルギーは $10^4$ 倍にも増大する。表1を見てわかるように△が $T_K$ より大きくても $D_0$ より充分小さければ $T_K$ は△=∞よりも△=0で縮退のある場合の高い $T_K$ に近い。

Table 1. Kondo temperature  $T_K$  for typical values of  $\Delta$  and  $\tilde{J}_0$

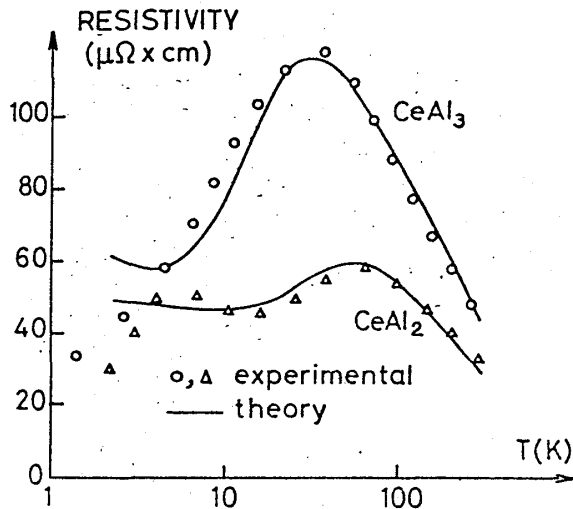
	$T_K$	$ \Delta $	$\tilde{J}_0$	$\tilde{J}_0^2$
$\Delta > 0$ (Case 1)	50	0	0.062	0.004
	10	100	0.062	0.004
	0.001	∞	0.062	0.004
	10	∞	0.145	0.021
$\Delta < 0$ (Case 2)	20	0	0.054	0.003
	10	100	0.054	0.003
	1	∞	0.054	0.003
	10	∞	0.072	0.005

(表1)  $\tilde{J}_0 = |J\rho|/N$ ,  $D_0 = 10^4 K$ .

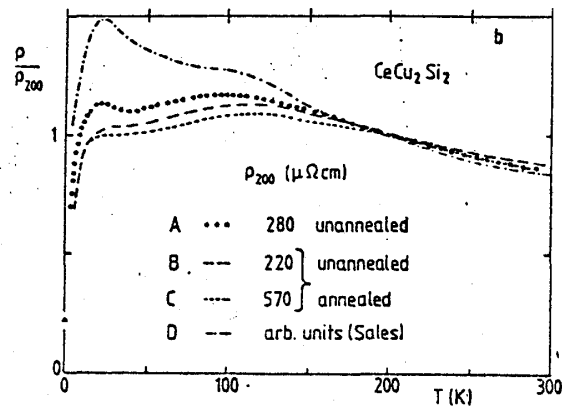
通常、Hund's coupling は $D_0$ に近い大きさであり、複数の電子や正孔をもつ系ではその効果で軌道やスピンを交換する自由度が抑えられ $T_K$ が低くなる。CeやYbでは1電子、1正孔のf-shellのため上述のように $T_K$ を高くできると考えられる。もし、結晶場と同様、Hund's coupling やs coupling が $T_K$ より大きくても $D_0$ よりかなり小さい場合には、 $T_K$ に影響を与えるわけである。



上述の議論を $\text{CeAl}_2$  (図3),  $\text{CeAl}_3$  (図3),  $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$  (図4)の電気抵抗に応用してみよう。Dに関する予のscaling則(3)式において、DをTにおきかえれば温度Tに関するscaling lawを得る。もし、 $T > \Delta$ の温度では(4)式のようにあたかも△=0の如く振舞う。つまり系は6重縮退の時の $T_K^0 = D \exp[N/3J_0\rho]$ をもつかの如くに振舞い、抵抗はTが下ると共に増大する。ところがTが△より低くなると結晶場が効いて、(6)式で与えられる本当の $T_K$ で系の振舞いは決定されるから、△に相当する温度は真の $T_K$ に比べ高温となり、抵抗は一度減少する。さらに温度が下り真の $T_K$ に近づくとき再び抵抗が増大することになる。これが $\text{CeAl}_2$ に見られる抵抗の2つの山と考えられる。 $\text{CeAl}_3$ はhexagonal構造で細く分れること、分裂自体小さいので1つのようになるらしい。 $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$ はCubicではないが(Tetragonal) 2つの結晶場のlevelが丁度、実験の領域内にあり、 $\text{CeAl}_2$ と同様の交わりが見られると考えられる、( $E_1 - E_0 = 140K$ ,  $E_2 - E_0 = 364K$ )。



(図 3)



(図 4)

最後に sites 間の相互作用が弱く、相対的に  $T_K$  が高い場合の Kondo lattice の基底状態について考えてみよう。磁性不純物に対する理論を参考にして<sup>4)5)</sup>、我々は most divergent 近似の範囲内では、異なる sites の局在 spins のからむ項は無視できることを示すことができる。(ただし、あくまで sites 間の相互作用が弱いという条件のもとである。)従って、single impurity の場合と同じ scaling law (例えば (3) の式) によって伝導帯の中  $D$  も小さくしていくと各 site 一斉に strong coupling の極限に近づき、夫々の sites で同じ  $T_K$  になり、結合エネルギーをもつ bound state が実現すると思われる。この時  $T_K$  での scaling law には sites 間の相互作用は効かないが、基底状態の波動関数は most divergent の範囲でも変化をうける<sup>6)</sup>。従って、一般に基底状態は各 site を中心とした bound state が periodic に実現しており、我々はその状態を出発点として sites 間の相互作用を擾動として取り入れていけばよいと思われる。

- 1). K. Yamada, K. Yosida and K. Hanzawa, Prog. Theor. Phys. に投稿中
- 2). I. Okada and K. Yosida, Prog. Theor. Phys. 49 (1973), 1483.
- 3). A. Ogawa and A. Yoshimori, " 53 (1975), 315.
- 4). K. Sato and Y. Nagaoka, Prog. Theor. Phys. 49 (1973), 1377.
- 5). H. Ishii, " 50 (1973), 1777.